DOI：10.3901/JME.20**.**.***

考虑纤维波纹度的单向复合材料代表性体积元生成算法*

谢晨阳[1] 黄鲛[2] 肖光明[3] 张贤杰[1] 王俊彪[1] 李玉军[1,3]
(1. 西北工业大学机电学院 西安 710072；
2. 中国航空工业集团公司雷华电子技术研究所 无锡 214063；
3. 中航西安飞机工业集团股份有限公司 西安 710089)

摘要：提出一种单向纤维增强复合材料(UD-FRP)周期性高保真代表性体积元(RVE)的创建算法。首先基于随机游走算法，采用贝塞尔(Bézier)曲线表征纤维形态，使曲线各控制点处的切线方向的统计分布服从多变量冯米斯-费歇尔(Von-Mises Fischer)函数，创建出初步的软核模型。进而基于力偏置算法，在保证 RVE 内部纤维不产生过度扭曲的前提下，调整纤维间的重叠，创建出对应的硬核模型。调整过程中，通过引入三维近邻列表算法，大幅提高算法效率。最后对所创建的含有纤维波纹度特征的 RVE 模型进行了横向剪切渐进损伤分析，用以揭示该方法的研究价值及应用领域。结果表明，该方法能够快速有效地创建不同尺寸及纤维波纹度的 RVE 几何构型，这种含有波纹度特征的纤维构型会对 UD-FRP 的横向剪切性能产生一定影响，纤维波纹度越大，UD-FRP 的横向剪切强度越大。

关键词：单向纤维增强复合材料；纤维波纹度；随机游走；周期性边界条件；近邻列表算法；力偏置算法；横向剪切
中图分类号：TG156

An algorithm to generate representative volume elements for unidirectional composites considering fiber misalignment

XIE Chenyang[1] HUANG Jiao[2] XIAO Guangming[3] ZHANG Xianjie[1] WANG Junbiao[1] Li Yujun[1,3]
(1. School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi’an 710072;
2. Avic Leihua Institute of Electronic Technology, Wuxi 214063;
3. Avic Xi'an Aircraft Industry Group Company Ltd, Xi’an 710089)

Abstract：A generation algorithm of periodic high fidelity representative volume element (RVE) model of unidirectional fiber-reinforced composites (UD-FRP) is introduced. Firstly, based on the random walk algorithm, the fiber morphology is characterized as the Bézier curve, and the tangent direction at each control point is adjusted to follow the multivariable von Mises Fischer function to generate a preliminary soft-core fiber network. Then based on the force-biased algorithm, the corresponding hard-core model is created by adjusting the overlap between fibers to ensure that the fibers in RVE do not twist excessively. In the adjustment process, a three-dimensional near-neighbor list is introduced to significantly improve the algorithm's speed. Finally, the RVE containing fiber waviness is preliminarily calculated for transverse shear, so as to reveal the research value and application field of this method. The results show that the RVE of the required size and fiber waviness can be generated effectively and quickly by this method, the transverse shear strength of UD-FRP can be affected by the fiber configuration with waviness characteristics. The transverse shear strength of UD-FRP increases with the increase of fiber waviness.

* 国家自然科学基金(11902256)。

Key words：unidirectional fiber reinforced composites; fiber misalignment; the random walk based stochastic modeling; periodic boundary conditions; near-neighbor list algorithm; the force-biased algorithm；transverse shear

0 前言

纤维增强聚合物复合材料（FRP）特殊的比刚度和强度使其成为结构应用的理想材料，其结构件在航空航天、海洋、土木工程、汽车等行业的应用日益广泛。在复合材料制造过程中，预浸料或干布中的纤维构型通常并不是理想的直纤维，对于单根纤维而言，纤维的局部错位导致该处主方向与整根纤维的预期主方向存在一定偏差，这种现象通常被称为纤维波纹度[1]。这种纤维本身构型特点是导致固化过程中产生残余应力的原因之一，同时也会对成型后的复材件的力学性能造成显著影响[2,3]。

纤维的波纹度特征往往会导致纵向压缩载荷下的纤维微屈曲[4]，这正是纤维增强复合材料主要损伤机制之一，并且这种微屈曲也使得复合材料的弯曲及剪切等力学性能产生较大波动，这种波动则会导致复合材料件力学性能上的不确定性[5]。因此，准确表征纤维的这种波纹度特征具有重要意义。

为准确表征 FRP 失效过程中的力学行为，有必要建立微观结构的高保真代表性体积元（RVE）用于分析其均质化特性。目前已有大量的工作致力于单向纤维增强复合材料（UD-FRP）高保真微观模型的构建，但其中大多数仅涉及二维 RVE 几何模型，聚焦于定义 RVE 内部的各种纤维分布特征和生成算法研究，如探寻法及随机顺序吸附（RSA）算法[6,7]。三维的 RVE 模型则是通过沿纤维方向简单地拉伸二维 RVE 得到，所有纤维均是平直排列。

现有研究表明，纤维的波纹度特征可以通过解析式表达（规则波纹度），也可通过随机过程来确定纤维的几何特性（随机波纹度）。目前很少有天然纤维[8]和普通纤维[9,10]实现随机波纹度特征的研究报告，若创建出可调控几何结构特征（纤维分布和波纹度）的 RVE 模型，便可进一步用于实际微观结构的均质化分析。

在微观力学计算中，数值均匀化需要使用适当的周期边界条件（PBC），RVE 边界条件施加的合理性直接决定了模型的计算效率和精度，进而影响模型的均匀化参数和相关机械性能的计算准确度[11]，而施加 PBC 的前提即要求 RVE 具有几何的周期性。

为了描述纤维波纹度特征对 UD-FRP 轴向损伤特性的相关影响，Catalanotti 和 Sebaey 等人开发了一种以统计方式表征纤维波纹度的半随机算法[12,13]。该算法首先将连续纤维离散为多组球体，通过电子计算机断层扫描（CT）确定 UD-FRP 内部各组纤维球的偏转角度，根据冯-米塞斯（von-Mises）分布对 CT 数据进行统计拟合，以浓度参数表征纤维波纹度的大小，最后利用随机扰动程序及优化程序保证 RVE 与实际试件具有相同的浓度参数，同时保证了模型自身的几何周期性。该算法虽构建出与实际 UD-FRP 在统计意义上具有相同纤维波纹度的 RVE 模型，但随机扰动程序仅单独作用于各纤维球上，没有考虑纤维上相邻球体间的相互作用，导致纤维在局部可能出现过度的扭曲，这在实际的纤维结构中是不存在的。

针对上述研究和分析，可见构建包含波纹度的周期性 RVE 可以准确用于探究波纹度特征对 UD-FRP 失效行为的影响，但是需要考虑模型自身的物理真实性。本文针对这一问题，提出了一种基于随机游走算法[14,15]，考虑 RVE 几何周期性及纤维波纹度特征的 UD-FRP 高保真微观力学模型生成算法，并将其用以损伤失效的相关有限元计算，这对解决 FRP 的实际应用问题具有重要意义。

1 算法架构

考虑纤维波纹度的UD-FRP周期性RVE创建主要由两个步骤构成：软核系统构建及硬核系统调整，如图 1 所示。

软核系统构建过程首先根据 RVE 纤维半径、纤维体积分数及 RVE 尺寸大小的要求，采用随机扰动方法创建出纤维的二维随机位置点，其创建方法已有诸多文献报告，此处不再赘述[16,17]。随后沿纤维主方向采用随机游走算法在已有的纤维位置点依次构建三维纤维构型，并最终对整个纤维系统进行几何周期性设置。该过程允许纤维间的相互重叠，因而称为软核纤维系统。

硬核系统调整过程则是在已构建的软核纤维系统基础上进一步加以调整，在纤维构型基本不变的前提下，消除纤维之间的重叠现象。该调整过程引入力偏置算法，即定义纤维间斥力/引力-相对距离及纤维自身弯曲力-曲率的关系式，并将其应用于已

创建的软核纤维系统。此外，为加速调整效率，引入三维近邻列表算法，该算法由 William Mattson 等人给出具体实现细节[18]。

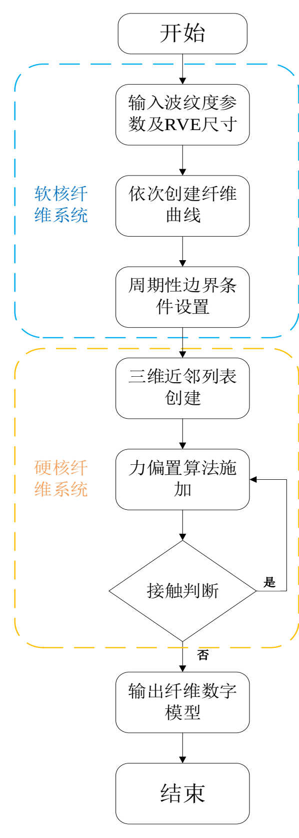


图 1 算法框架示意图

2 重叠纤维软核系统创建

2.1 随机游走算法生成单根纤维

根据 RVE 纤维半径及纤维体积分数的要求，可简单创建出随机的二维纤维位置点，为创建包含波纹度特征的纤维构型，利用纤维随机游走算法依次单独创建出每一根纤维，该过程中采用 Bézier 曲线表征每根纤维的形态，曲线各控制点的方向均服从冯米塞斯-费歇尔(Von-Mises Fischer)分布。该分布作为一种常见的分布函数，常用以描述希望具有优先方向以及相应可靠性参数的目标方向，如下式所示：

$$f(\boldsymbol{u}\,|\,\boldsymbol{\mu},k)=\frac{k\cdot e^{k\boldsymbol{\mu}^T\boldsymbol{u}}}{2\pi(e^{k}-e^{-k})} \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{u}$ 为目标方向向量，$\boldsymbol{\mu}$ 表示优先方向向量，k 则为相对应的可靠性参数。

本算法中各根纤维曲线的控制点个数 s 由 RVE 的轴向长度 L_3 及纤维半径 r 共同决定：$s=(L_3/r)+1$，并定义第 $i(i=1,2,...,s)$ 个控制点的方向 $\boldsymbol{\mu}_2^i$ 为第 i 个控制点与第 i-1个控制点的相对方向，即 $\boldsymbol{\mu}_2^i=(x_i-x_{i-1},y_i-y_{i-1},z_i-z_{i-1})$。

考虑到若采用上述单变量冯米塞斯-费歇尔分布的随机游走算法，将导致较长的纤维曲线可能弯曲成圆形，不符合 UD-FRP 的几何要求。因此为确保所创建纤维曲线物理结构的真实性，采用多变量冯米塞斯—费舍尔分布以保证纤维曲线的各控制点同时与 UD-FRP 的轴向方向，即 RVE 全局主方向和前一个控制点的切线方向同时具有一定的相关性。该分布函数由单变量冯米塞斯—费舍尔分布扩展而来，可描述同时具有两个优先方向向量 $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$ 以及对应可靠性参数 k_1,k_2 的目标方向，如下式所示：

$$f(\boldsymbol{u}\,|\,\boldsymbol{\mu_1},k_1,\boldsymbol{\mu_2},k_2)=I(\boldsymbol{\mu_1},k_1,\boldsymbol{\mu_2},k_2)\cdot e^{k_1\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{u}+k_2\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{u}} \tag{2}$$

$$I(\boldsymbol{\mu_1},k_1,\boldsymbol{\mu_2},k_2)=\frac{|k_1\boldsymbol{\mu_1}+k_2\boldsymbol{\mu_2}|}{2\pi(e^{|k_1\boldsymbol{\mu_1}+k_2\boldsymbol{\mu_2}|}-e^{-|k_1\boldsymbol{\mu_1}+k_2\boldsymbol{\mu_2}|})} \tag{3}$$

上式中第一个优先方向 $\boldsymbol{\mu_1}$ =(0,0,1)为 RVE 的全局主方向。第二个优先方向 $\boldsymbol{\mu_2}(x,y,z)$ 则代表每一个控制点的方向方向，且为单位向量 $|\boldsymbol{\mu_2}|$=1，k_1 与 k_2 分别为其对应的相关性参数。对比可得，每一个多变量 vMF 分布都可以写成带有参数的经典 vMF 分布，参数由下式确定：

$$k=|k_1\boldsymbol{\mu_1}+k_2\boldsymbol{\mu_2}| \tag{4}$$

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{k_1\boldsymbol{\mu_1}+k_2\boldsymbol{\mu_2}}{k} \tag{5}$$

对于本文的模型，k_1 值的大小决定纤维各控制点方向与 RVE 全局主方向的相关性，k_2 值的大小决定了控制点与前一个控制点方向的相关性，两者共同决定纤维自身的波纹度特征。针对本文的 UD-FRP，当 k_1 一定时，k_2 越小则纤维控制点游走的随机性越高，即纤维的波纹度越大，k_2 越大则情况相反。

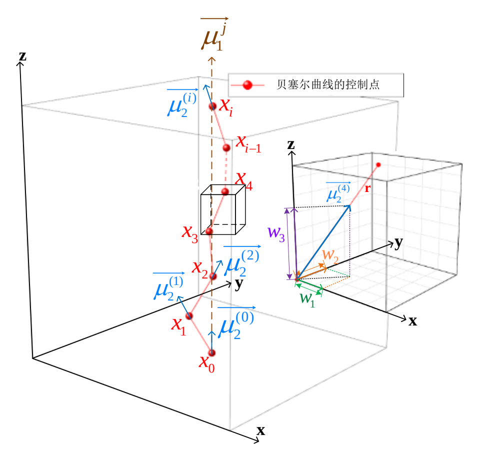


图 2 单根纤维曲线的控制点空间参数

在描述每个控制点的具体生成过程之前，需要明确算法中各控制参数，以 RVE 中的第 j 根纤维为例，如图 2 所示。r 即为控制点的间距，由上文可知其取为纤维的半径。$\boldsymbol{\mu}_1^j(j=1,\dots,n)$ 表示第 j 根纤维的轴向方向，通常取为 RVE 的全局主方向，该 RVE 共包含 n 根纤维。取 $w_i(i=1,2,3)$ 为控制点的方向向量 $\boldsymbol{\mu_2}$ 在坐标系各轴上的投影分量的大小，因此对于纤维上的每个控制点的方向向量 $\boldsymbol{\mu_2}(w_1,w_2,w_3)$，有:

$$w_1^2+w_2^2+w_3^2=1 \tag{6}$$

对于每根纤维曲线，所示算法的具体过程如下：

Step 1：为保证 $|\boldsymbol{\mu_2}|=1$，且服从多变量 vMF 分布,定义：

$$w_1=\sqrt{1-M}\cdot N_1 \tag{7}$$

$$w_2=\sqrt{1-M}\cdot N_2 \tag{8}$$

$$w_3=M \tag{9}$$

其中 M 与 $\boldsymbol{N}$ 均为独立的随机变量，取 $\boldsymbol{N}$ 为单位圆上的随机数，有:

$$N_1^2+N_2^2=1 \tag{10}$$

而 M 遵循分布函数:

$$f(v\mid k)=\frac{ke^{kv}}{e^k-e^{-k}} \tag{11}$$

Step 2：计算 vMF 分布的累积分布函数 $F(x)$：

$$F(x)=\frac{e^{kx}-e^{-k}}{e^k-e^{-k}} \tag{12}$$

Step 3：为生成符合 vMF 分布的随机变量，计算累积分布函数的反函数 $F^{-1}(y)$ 如下式:

$$F^{-1}(y)=\frac{1}{k}\log(e^k+(1-y)e^{-k}) \tag{13}$$

其中 y 为 $(0,1)$ 上的随机数，代入上式计算之后使得 $M=F^{-1}(y)$；

Step 4：依次计算得到纤维曲线各个控制点的方向向量 $\boldsymbol{\mu_2}$；

Step 5：给定 RVE 模型的几何尺寸 $L_i(i=1,2,3)$，则每根纤维上的控制点个数得以确定:

$$s=(L_3/r)+1 \tag{14}$$

Step 6：计算得到纤维上各个控制点的坐标;

Step 7：生成 Bézier 曲线，此时曲线总长大于给定 RVE 的高度 L_3，曲线的解析式如下:

$$B(t)=\sum_{i=0}^{s}\binom{s}{i}x_i(1-t)^{s-i}t^i \tag{15}$$

2.2 纤维主方向与球链坐标标定

上文算法均使单根纤维生成于原点位置，并且将 Bézier 曲线沿 z 方向平均赋予 r_t 个球体，即纤维由一串连续球链构成，r_t 的值只需保证最终生成纤维的光顺性即可，如图 3 中灰色球链所示。

虽然初始取向 $\boldsymbol{\mu}_2^0=(0,0,1)$ 是根据全局主方向进行选择的，但由于该算法中 $\boldsymbol{\mu}_2^i$ 的随机性而导致最终的平均纤维取向产生偏差。为了保证 UD-FRP 的全局取向分布，旋转生成的的纤维曲线，使平均纤维取向与 RVE 的全局主方向 $\boldsymbol{\mu_1}$=(0,0,1)保持一致，在此过程中纤维的结构(长度、半径、弯曲)始终保持不变。

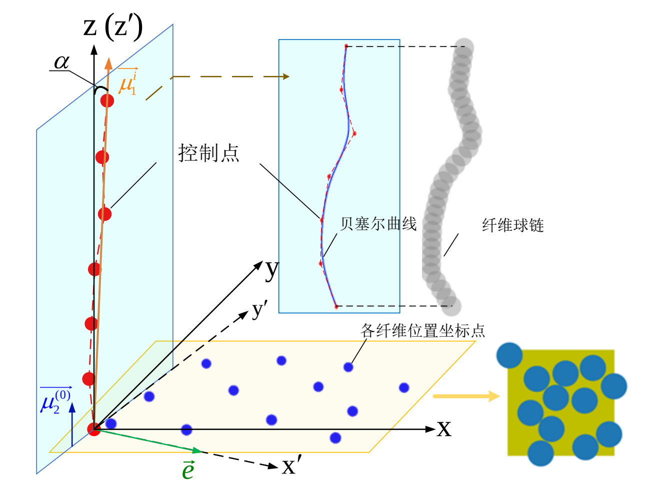


图 3 单根纤维的创建示意图

$\boldsymbol{e}$ 为 $\boldsymbol{\mu}_1^j$ 和 $\boldsymbol{\mu_1}$ 的法向量，$\boldsymbol{\alpha}$ 为 $\boldsymbol{\mu}_1^j$ 与 $\boldsymbol{\mu_1}$ 的偏差夹角，$\boldsymbol{\omega}$ 为旋转前该根纤维上第 $k(k=1,\dots,r_t)$ 个球体 $r_t^{(k)}$ 相对该纤维上第一个球体 $r_t^{(0)}$ 的方向:

$$\boldsymbol{\omega}=x_i^k-x_i^0(i=1,2,3) \tag{16}$$

$$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{\mu_1}\times\boldsymbol{\mu_1^j} \tag{17}$$

则可定义旋转矩阵 $\boldsymbol{D}$ 为:

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{e},\boldsymbol{\alpha})\\&=(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{\omega})\boldsymbol{e}+\cos\boldsymbol{\alpha}((\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{\omega})\times\boldsymbol{e})+\sin\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{\omega})\end{aligned} \tag{18}$$

其中“·”表示标量积，“×”表示叉积。因而纤维上第 k 个球体旋转后的坐标为其旋转矩阵与该纤维上第一个球体的坐标之和:

$$x_i^{k'}=x_i^0+\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{e},\boldsymbol{\alpha}) \tag{19}$$

最终将旋转后的纤维依次整体平移至 RVE 空间内的相对位置上，通过该随机游走算法对每一根纤维进行上述操作，即可初步建立了一个由重叠球链构成的软核纤维模型。

2.3 几何周期性设置

在复合材料多尺度力学分析中，使用周期性 RVE 可大幅减少分析的难度及计算量，且数值的均

匀化通常需要施加周期性边界条件，为满足计算所需的周期性边界条件设置，需要对模型划分周期性的网格结构，前提则是所建立的 RVE 几何模型需要沿三个方向呈现周期性的特点[19]。

首先对所建纤维球链点的坐标进行位置判定，上文已将每根代表纤维的 Bézier 曲线使用一组等间距的球体进行了赋值，并且通过旋转矩阵可以保证 RVE 沿着轴向方向（ Z 方向）具有周期性的特点，因此为实现另外两个方向的周期性，现将 RVE 的所有球体按 Z 方向以球链间距 $L_3/(r_t-1)$ 划分为 r_t 个平面 $P_i(i=1,,,r_t)$，单独对每一个平面上的球链点进行周期性条件的设置，如图 4 所示，需注意图 4 中仅以纤维体积分数 58.9%，RVE 三个方向尺寸均为 108 μm 的纤维系统作为示意概念图，RVE 具体的纤维数量则由初始创建的二维纤维坐标点数据确定。

基于周期性条件对 RVE 边界处的几何特征坐标的周期性特点要求[19]，对于各平面内的球体，需要考虑 n 个球心（图 4 中蓝色球体）的坐标 x_i^k（i=1,2；k=1,…,n）超出了 RVE 的几何范围 L_i 时，则应在其对称位置生成一个新的球体以保证 RVE 的几何周期性，其它完全位于 RVE 范围内部的球体则无需改变其坐标值。

$$\lambda_i=\begin{cases}L_i,x_i^k\le r\\0,r\le x_i^k\le L_i-r\\-L_i,x_i^k\ge L_i-r\end{cases}\tag{20}$$

$$x_i^{k+1}=x_i^k+\lambda_i\tag{21}$$

位于平面四个角点处的球体（图 4 中红色球体）应对应其他三个角点处的球体同时保证其周期性，即在另外三个角点的对应位置同时创建对应周期性条件的球体。

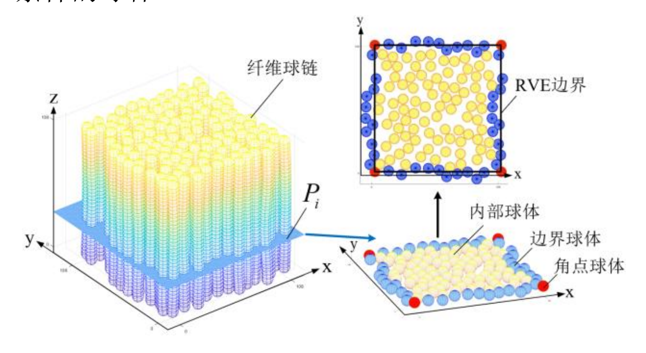


图 4 RVE 周期性边界条件设置概念图

依次对 r_t 个平面上的球体进行上述周期性设置，即可保证该软核纤维系统整体的几何周期性。

3 非重叠纤维硬核系统创建

3.1 三维近邻列表算法

上文已创建出满足所需纤维波纹度特征的软核纤维系统，该系统中各纤维之间允许发生重叠，因此在非重叠纤维硬核系统的调整过程中需要对重叠的纤维球体间施加力偏置算法，以分离相互重叠的纤维。

为施加该扰动，准确判断纤维球链上的每一个球体与其他纤维球链是否重叠及重叠的球体坐标尤为重要，而这将耗费大量的计算时间。本文引入三维近邻列表算法，用以加速该过程。每个球心的近邻列表中包含了所有可能与其重叠的其他球心点（距离小于半径之和），在近邻列表中搜索目标纤维球链上所有球心的近邻球心，能快速找到与之重叠的纤维球链以及产生重叠的小球。在施加作用力之前，可以快速找到可能与之重叠的纤维球链，然后在后续创建硬核纤维系统的过程中只需考虑纤维球链是否与其近邻列表内的球体充叠，即利用三维近邻列表的方法加速纤维球链间重叠情况判断的过程，提高本算法的效率。

在创建近邻列表之前，将空间分割为多个立方体小区域，如图 5 所示。小立方区域的边长不小于纤维半径，其每个顶点均设为结点。区域内的所有球心点的坐标向下取整后分配到对应的结点处（$q_i^{'}\in q_i$），便于缩小搜索范围。取每一个球体球心点为其三维近邻列表的原点（近邻列表的中心点），创建每个球体的三维近邻列表，则近邻列表中即包括所有可能与原点重叠的近邻球体，进而得到所有与该球心可能重叠的结点。通过仅读取各球体近邻列表内的其他球心点，可以省略近邻列表外球体的影响，大幅减少碰撞判断及施加作用力的迭代次数，从而加速算法。

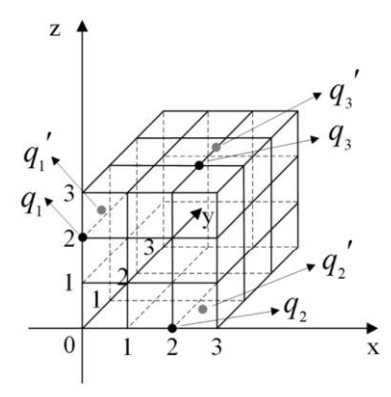


图 5 三维近邻列表示意图

同时可将决定 RVE 几何周期性的外围纤维球链和内部其他纤维球链的近邻列表数据分开存储，首先对外围纤维球链进行硬核系统的创建过程，随

后固定其球心坐标，对内部的其他纤维球链进行该过程，以此保证 RVE 的几何周期性不会被破坏。

3.2 纤维间斥力

由于要求 RVE 中的纤维与纤维之间不可产生重叠，因此建模过程中当不同球链（不同纤维）存在重叠时，需要施加斥力以恢复其刚性接触。需要注意的是，本文的方法中允许同一球链内部的球体重叠。如图 6 所示，游走过程中两球链相互重叠，其半径同为 r 。而其中重叠度最大的两球（不同球链上）位置点分别为 q_1、q_2。两个球体间的斥力与其重叠度相关，重叠度 Δl 为两球互相重叠的区域大小：

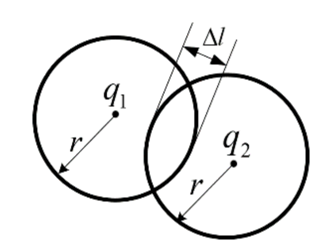


图 6 两球重叠模型

$$\Delta l = \left|2r - \|\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2\|\right| \tag{22}$$

则球 q_1 受到的斥力为：

$$F_{q_1} = K_r \frac{\Delta l}{2} \frac{\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2}{\|\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2\|} \tag{23}$$

式中 K_r 为球链的斥力常数，可由纤维的密度、半径及长度等材料与几何参数定义，因篇幅原因，计算模型本文不作具体描述，详情见参考文献[15,20]。球 q_2 同时受到大小相同，方向相反的斥力，每个球体所受的总斥力为其近邻列表内其他球体对其所施斥力的矢量和。

3.3 引力及弯曲力

在硬核系统的调整过程中，为保证纤维构型不因外力作用下过度扰动，并避免过度弯折，在同一纤维球链的球体之间施加拉压弹簧和弯曲弹簧，如图 7 所示。

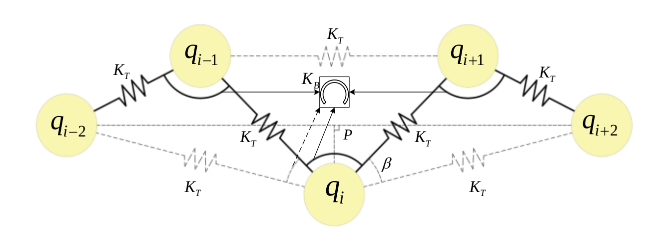


图 7 力偏置算法示意图

拉压弹簧限制球链间沿轴向的拉伸及压缩，其弹性常数为 K_T。同时为了保证球链的紧凑性，令球 q_i 不仅受到相邻前后两球 q_{i-1} 和 q_{i+1} 的弹簧力，还受到间隔前后两球 q_{i-2} 和 q_{i+2} 的弹簧力 （不包括纤维两端的球体）由于球链在运动过程中前一个球 q_{i-1} 的弹簧恢复力对下一个球 q_i 产生作用使其发生位移，而球 q_i 位置的改变又对后面的球 q_{i+1} 产生弹簧恢复力，如此循环往复下，该过程稳定性降低且将无法收敛。为了稳定运动，我们引入了一个摩擦因子 $f_{\delta_{\min},\delta_{\max}}$，其作用类似于摩擦力，用以限制纤维的拉压弹簧恢复力并稳定球链的运动，即当弹簧因伸长或压缩长度变化量在 $\delta_{\min}$ 以内时，不产生弹簧恢复力；当弹簧长度变化量逐渐增大到 $\delta_{\max}$ 时，弹簧恢复力的强度达到正常水平，如图 8 所示。其数学表达式如下：

$$f_{\delta_{\min},\delta_{\max}}(\delta) = \begin{cases} 0 & ,\delta < \delta_{\min} \\ 1/2 - 1/2\cos[(|\delta| - \delta_{\min})\pi/(\delta_{\max} - \delta_{\min})] & ,\delta_{\min} < \delta < \delta_{max} \\ 1 & ,\delta_{max} < \delta \end{cases} \tag{24}$$

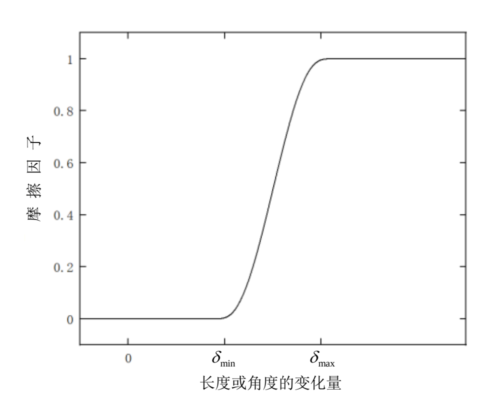


图 8 弹簧摩擦因子

定义弹簧力的大小与弹簧长度的变化量呈线性关系，半径为 r 的球体 q_i 受球链上下一个球体 q_{i+1} 的拉压弹簧恢复力定义为：

$$F_{T,q_i} = K_T f_{\delta_{\min},\delta_{\max}}\left(\frac{r/2 - \|\boldsymbol{q}_i - \boldsymbol{q}_{i+1}\|}{r/2}\right)(r/2 - \|\boldsymbol{q}_i - \boldsymbol{q}_{i+1}\|)\frac{\boldsymbol{q}_i - \boldsymbol{q}_{i+1}}{\|\boldsymbol{q}_i - \boldsymbol{q}_{i+1}\|} \tag{25}$$

其中代表球链拉压弹簧的弹性常数，同样根据实际纤维参数进行定义[15,20]。对于本文的模型，式中摩擦因子中的 $\delta_{\min}$ 和 $\delta_{\max}$ 无特殊要求，选取条件较为宽松，一般按经验进行选取，只需能够实现算法稳定运行即可。为实现本文的模型，其分别取为 0.01 和 0.02。除此之外，球 q_i 同时还受到球体 q_{i-2}、q_{i-1} 及 q_{i+2} 的弹簧恢复力。以此类推，可以得到整个球链系统所有施加斥力后的球体受到的拉压弹簧恢复力。

在球链保持连续性的同时，需要保证其结构的光滑性，因此在球与球间施加角度力，即弯曲弹簧，其弹簧常数为 K_B，同样根据实际纤维参数进行定义[15,20]。与拉压弹簧力相同，每个球体均受到其相

邻四个球的角度力（不包括两端球）。

对球 q_i 受到球 q_{i-2} 及球 q_{i+2} 的角度力进行分析，假设三个球体初始时的夹角为 π，变化后夹角为 γ。球 q_i 到球 q_{i-2}、球 q_{i+2} 连线的垂足为 P，定义角度力方向为 $\overrightarrow{q_i p}$，大小与球体 q_i 偏离初始坐标的距离成线性关系，由此可见弯曲弹簧恢复力即为避免受到斥力的重叠纤维球体在此局部区域过度变形，使其具有向直纤维形式变形的趋势。同时考虑摩擦因子的影响，则球 q_i 受到球 q_{i-2} 和球 q_{i+2} 的弯曲弹簧恢复力如下：

$$F_{B,q_i} = K_B f_{\delta_{\min},\delta_{\max}} (\frac{\pi-\gamma}{\pi})(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q_i}) \tag{26}$$

球 q_{i-2} 及球 q_{i+2} 也同时受球 q_i 的角度力作用，方向与 F_{B,q_i} 相反，大小为其一半。同理，球 q_i 也受到球 q_{i-1} 及球 q_{i+1} 的角度力。弯曲弹簧恢复力摩擦因子的选取与拉压弹簧恢复力相同，对于本文的模型，摩擦因子 $\delta_{\min}$ 与 $\delta_{\max}$ 分别取 0.0028 及 0.0056。

3.4 硬核系统调整的实施过程

上述算法首先对各纤维球体遍历进行重叠判断，已经明确三维近邻列表可以大幅加速这一判断过程，在此过程中，某一纤维球体 q_1 可能同时与其近邻列表内的多个其他纤维的球体同时发生重叠，便于算法实施，选取与此纤维球体重叠度 Δl 最大的一个纤维球体 q_2 进行记录，暂时忽略其他重叠球体的影响。随后，依次对所记录的球体施加斥力，再施加拉压弹簧恢复力及弯曲弹簧恢复力，且两种弹簧力作用只发生在受斥力的球体 q_i 自身的单元组内（即同一根纤维上与球体 q_i 相邻的四个球体 q_{i-2}，q_{i-1}，q_{i+1} 及 q_{i+2}），对单元组外球体的影响不再做考虑，以免算法将无休止地进行，无法收敛。

所记录的重叠球体 q_i 所受总力即为其近邻列表内与其具有最大重叠度的另一球体对其施加的斥力以及其自身单元组内相邻球体对其施加的弹簧力及角度力的矢量和。在对记录内的全体重叠球体进行上述操作后，再次进行遍历重叠判断，重复以上过程。

由于该硬核调整过程每次仅针对记录内的一对最大重叠度的纤维球体及其自身单元组内的几个纤维球体，因而计算速度较快，也能保证在纤维的该局部区域具有物理结构的真实性，同时整个硬核调整过程会使发生重叠处的局部纤维段趋向于平直排列，因此在保证较高的纤维体积分数的同时，上述过程也容易达到收敛。

综上，通过对外部周期性纤维球链和内部纤维球链分别记录，施加上述作用力，生成具有周期性几何条件的各球链坐标，进而创建包含纤维波纹度特征的 UD-FRP 高保真 RVE 模型。

4 RVE 模型创建及探究

4.1 三维高保真 RVE 模型构建

为将纤维的数字模型（球链上的球心坐标及各球链的半径）快速转换为实体模型，本文基于 Microsoft Visual Studio 载体进行框架搭建（应用语言为 C++），并适配建模软件 CATIA V5 开发集成。通过读取纤维的数字模型，对纤维进行快速的实体建模，最终生成具有不同纤维波纹度特征的 UD-FRP 三维实体模型。

图 9 所示为所创建的不同纤维波纹度（$k_2 = 200, 400$ 及直纤维）下，纤维体积分数 58.9%，纤维半径 4.5 μm，RVE 尺寸为 $108\times108\times108\mu m$ 的 RVE 几何模型示意图。

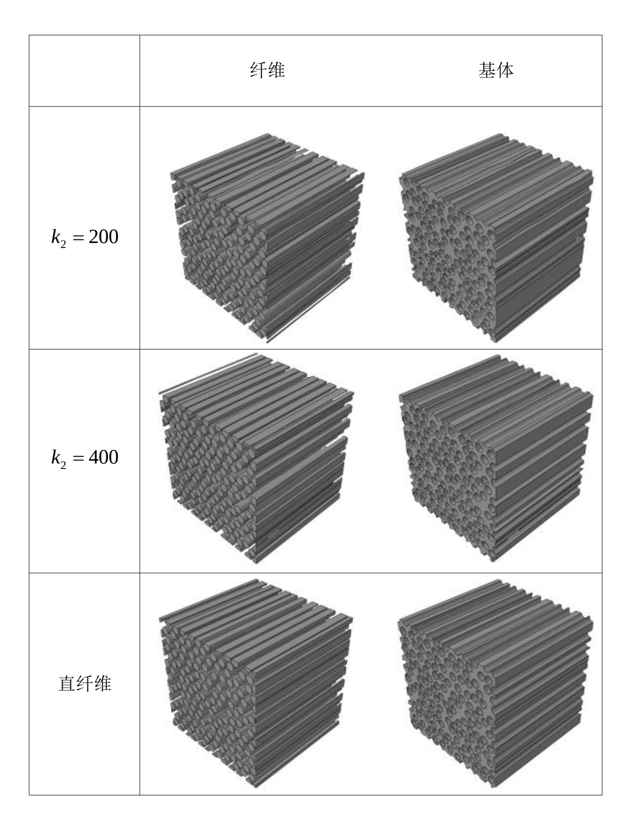


图 9 不同纤维波纹度的 RVE 模型

4.2 纤维波纹度对横向剪切性能的影响

上文创建了具有纤维波纹度特征的 RVE 几何模型，选用 T300/5284 复合材料建立 UD-FRP 横向剪切的微观力学计算模型。T300 纤维作为 FRP 广泛使用的一种增强相材料，领域内已有标准性能参考数值[21]，如表 1 所示。

表 1　T300 纤维性能

参数类型	参数值
E_1/GPa	228
E_2=E_3/GPa	17.2
ν_{12}=ν_{13}	0.2
ν_{23}	0.5
G_{12}=G_{13}/GPa	27.6
G_{23}/GPa	5.73
断裂应变/ε_d	0.03078
应变能释放率/G_{IC}	0.2J/m^2

对于 5284 树脂基体，已有相关研究表明其对静水压力敏感[22]，因此采用 Drucker-Prager 模型描述其塑性行为，其屈服函数如下：

$$F = t - ptan\beta - d = 0 \tag{27}$$

其中，p 为静水压力，β 为摩擦角，d 为树脂基体的内聚力，t 为屈服剪应力，均可由下式得出：

$$p = -trace(\sigma)/3 \tag{28}$$

$$tan\beta = \frac{6\times sin\varphi}{3 - sin\varphi} \tag{29}$$

$$d = (\frac{1}{k} + \frac{1}{3}tan\beta)\sigma_t \tag{30}$$

上式中 $k = \dfrac{3-\sin\varphi}{3+\sin\varphi}$，为三轴拉伸屈服应力与三轴压缩屈服应力之比，$\varphi$ 为 M-C 模型的摩擦角：

$$\sin\varphi = \frac{\sigma_c - \sigma_t}{\sigma_c + \sigma_t} \tag{31}$$

以上 σ_t 及 σ_c 分别代表材料抗拉强度及抗压强度，屈服剪应力 t 则可由下式表示：

$$t = \frac{1}{2}q[1 + \frac{1}{k} - (1 - \frac{1}{k})(\frac{r}{q})^3] \tag{32}$$

其中，q 代表 Mises 等效应力，r 代表偏应力张量的第三不变量。

5284 树脂在承受单轴拉伸载荷时，在相对较小的应变下即会发生脆性断裂，在单轴压缩或剪切载荷下，则具有明显的屈服及塑性变形。为准确表示树脂材料在不同条件下的损伤行为，采用 Ductile Damage 定义树脂基体的损伤起始及演化，基体刚度随损伤起始条件的不同而降低，性能标定如表 2 所示。

表 2　5284 树脂基体性能

参数类型	参数值
弹性模量 E/GPa	1.8
拉伸屈服强度 σ_{t0}/MPa	17.34
压缩屈服强度 σ_{c0}/MPa	82.75
抗拉强度 σ_t/MPa	58.78
抗压强度 σ_c/MPa	160.28
Drucker-Prager 摩擦角/β	47.63°
流动应力比/k	0.778

针对含有不同纤维波纹度 k_2 的 RVE 力学模型展开横向剪切的有限元计算。RVE 的宏观力学性能计算对 RVE 尺寸及网格大小均具有一定的敏感性，因此有必要进行相关收敛性分析，据现有研究结果，针对 UD-FRP 的 RVE，其三维尺寸均为纤维半径的 24 倍（即 RVE 尺寸为 $24r\times24r\times24r$）时，网格尺寸为纤维半径的 1/4 倍（即网格尺寸为 $r/4$）时，有限元分析的计算结果有效，可被用于宏观力学性能分析[17]。本例中采用的 T300 纤维半径为 4.5 μm，因此利用上文所述算法，创建 $k_2 = 200$，三边尺寸为 $24\cdot r$，即 $108\times108\times108\mu m$ 的 RVE 模型，由于纤维与基体各自的几何形状较为复杂，采用 C3D4 三维线性四面体进行网格划分，网格尺寸为 $r/4 = 1.125\mu m$，如图 10 所示。

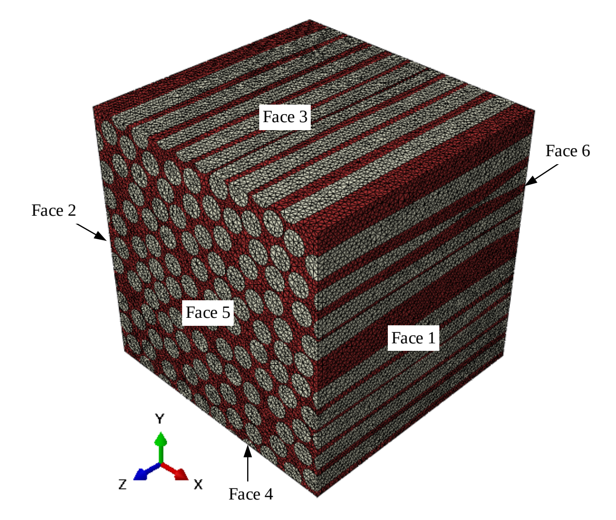


图 10　$k_2 = 200$ 时 RVE 的网格模型及各边界面示意图

基于 RVE 建模的一个重要方面是 RVE 的尺寸大小和施加的边界条件，应用的边界条件将会影响整体的机械性能[23]。此外，当有限元模型足够大时，可以忽略边缘和面效应[24]。因此本文采用标准边界条件，将直接约束应用于 RVE 的边界，即运动统一边界条件（KUBC），具体设置如下：

面 2 沿全厚度（y 方向）方向固定，横向剪切位移（y 方向）应用于面 1，在面 3 和面 4 之间应用连接约束（Tie Constraints），面 5 和 6 可以自由变形。

有限元计算所得 RVE 的横向剪切应力应变曲线如图 11 所示，结果初步表明，不同的 k_2 值下，曲线的斜率未见显著差别，即纤维波纹度特征对 UD-FRP 的横向剪切模量没有明显的影响，然而纤维波纹度特征对其横向剪切的强度有着一定的强化

作用，纤维波纹度越大（即 k_2 的值越小），应力应变曲线的峰值越高，即 UD-FRP 的横向剪切强度越高。

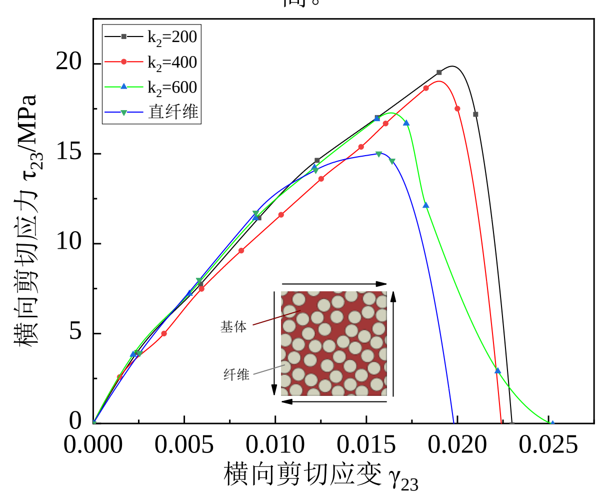


图 11 不同纤维波纹度下 UD-FRP 横向剪切应力应变曲线图

这种影响规律初步考虑是由于纤维的弯曲使得纤维与基体在任意一个裂纹扩展面内的接触面积增加，因而纤维为基体承担了更多应力，同时也更加容易阻碍基体裂纹的扩展，因此需要更大的应力及应变才会导致剪切损伤破坏的发生，UD-FRP 的横向剪切强度得以提高。

5 结 论

本文针对单向纤维增强复合材料(UD-FRP)，基于纤维随机游走算法，结合三维近邻列表，在提高算法速率及准确性的同时，保证了代表性体积单元（RVE）的几何周期性不被破坏，成功构建出可控纤维波纹度的高保真几何结构。随后针对创建的模型分别展开了横向剪切计算，得到以下结论：

（1）通过多变量冯米斯-费歇尔分布控制纤维的波纹度特征，在调控波纹度大小的同时，通过该分布自身的特性保证了纤维的物理真实性，避免了纤维在局部产生弯折过度的问题，更加贴合实际的纤维结构。

（2）改变算法中的可信度参数 k_1 及 k_2 即实现 RVE 模型纤维波纹度的更改，k_2 设置越小则所建纤维的波纹度越高，最终通过 CATIA 的二次开发技术进行实体模型的快速创建。

（3）通过对不同纤维波纹度的 RVE 展开横向剪切强度的有限元计算，对比计算结果可以初步看出，这种波纹度特征会对 UD-FRP 的横向剪切强度造成一定影响，纤维波纹度越大，UD-FRP 的横向剪切强度越大。

参 考 文 献

[1] Alves M P, Junior C A C, Ha S K. Fiber waviness and its effect on the mechanical performance of fiber reinforced polymer composites: An enhanced review[J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2021, 149: 106526.

[2] 刘登俊，关庆丰，王志平,等. 电热处理对湿热环境作用下碳纤维环氧复合材料的损伤机制[J]. 机械工程学报,2017,53(18):64-70.
LIU Dengjun, GUAN Qingfeng, WANG Zhiping, et al Damage mechanism of electrothermal treatment on carbon fiber epoxy composites under humid and hot environment [J] Journal of mechanical engineering, 2017,53 (18): 64-70.

[3] 谭华，晏石林. 热固性树脂基复合材料固化过程的三维数值模拟[J]. 复合材料学报, 2004, 21(6): 167-172.
TAN Hua, YAN Shilin. Three-dimensional simulation of curing process for thermoset composites[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2004, 21(6): 167-172.

[4] C.J. Creighton, M.P.F. Sutcliffe, T.W. Clyne, A multiple field image analysis procedure for characterisation of fibre alignment in composites, Composites Part A 32 (2001) 221–229.

[5] W.J.R. Christian, F.A. DiazDelaO, K. Atherton, E.A. Patterson, An experimental study on the manufacture and characterization of in-plane fibre-waviness defects in composites, R. Soc. Open Sci. 5 (2018) 180082.

[6] Melro AR, Camanho PP, Pinho ST. Generation of random distribution of fibres in long-fibre reinforced composites. Compos Sci Technol 2008;68:2092–102.

[7] Vaughan TJ, McCarthy CT. Micromechanical modelling of the transverse damage behaviour in fibre reinforced composites. Compos Sci Technol 2011;71:388–96.

[8] Faessel M, Delisée C, Bos F, Castéra P. 3d modelling of random cellulosic fibrous networks based on x-ray tomography and image analysis. Compos Sci Technol 2005;65(13):1931–40.

[9] Recchia Stephen, Zheng James, Pelegri Assimina A. Fiberwalk: a random walk ap-proach to fiber representative volume element creation. Acta Mech Apr 2014;225(4):1301–12.

[10] Altendorf Hellen, Jeulin Dominique. Random-walk-based stochastic modeling of

three-dimensional fiber systems. Phys Rev E Apr 2011;83:041804.

[11] 朱晓鹏，陈磊，黄俊. 复合材料周期结构数学均匀化方法的一种新型单胞边界条件[J]. 计算力学学报, 2021, 38(3):10.
ZHU Xiaopeng，CHEN Lei，HUANG Jun. A new unit cell boundary condition for mathematical homogenization method of composite periodic structure [J] Journal of computational mechanics, 2021, 38 (3): 10.

[12] Gc A, Tasb C. An algorithm for the generation of three-dimensional statistically Representative Volume Elements of unidirectional fibre-reinforced plastics: Focusing on the fibres waviness[J]. Composite Structures, 227.

[13] Tasa B, Gc C, N.P. O'Dowd. A microscale integrated approach to measure and model fibre misalignment in fibre-reinforced composites[J]. Composites Science and Technology, 183:107793-107793.

[14] Altendorf H, Jeulin D. Random-walk-based stochastic modeling of three-dimensional fiber systems[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear & Soft Matter Physics, 2011, 83(4):041804.

[15] Chapelle L, M Lévesque, P Brøndsted, et al. Generation of non-overlapping fiber architecture[C]// the 20th International Conference on Composite Materials. ICCM20. 2015.

[16] Catalanotti G. On the generation of RVE-based models of composites reinforced with long fibres or spherical particles[J]. Composite Structures, 2016, 138(mar.):84-95.

[17] Varandas L F, Catalanotti G, Melro A R, et al. Micromechanical modelling of the longitudinal compressive and tensile failure of unidirectional composites: The effect of fibre misalignment introduced via a stochastic process[J]. International Journal of Solids and Structures, 2020, 203:157-176.

[18] Mattson W, Rice B M. Near-neighbor calculations using a modified cell-linked list method[J]. Computer Physics Communications, 1999, 119(2–3):135-148.

[19] Kashtalyan M . Finite Element Analysis of Composite Materials using Abaqus™[J]. Aeronautical Journal, 2014, 118(1199):98-99.

[20] Altendorf H, Jeulin D. Random-walk-based stochastic modeling of three-dimensional fiber systems[J]. Physical Review E, 2011, 83(4): 041804.

[21]郭慧，黄玉东，刘丽,等. T300 和国产碳纤维本体的力学性能对比及其分析[J]. 宇航学报, 2009(5):5.
GUO Hui, HUANG Yudong, LIU Li, et al Comparison and analysis of mechanical properties between T300 and domestic carbon fiber body [J] Journal of Astronautics, 2009 (5): 5.

[22] Hui X, Xu Y, Zhang W. An integrated modeling of the curing process and transverse tensile damage of unidirectional CFRP composites[J]. Composite Structures, 2021, 263(5):113681.

[23] Triantafyllidis, N., Bardenhagen, S., 1996. The influence of scale size on the stability of periodic solids and the role of associated higher order gradient continuum models. J. Mech. Phys. Solids 44 (11), 1891–1928.

[24] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. Int. J. Solids Struct. 40 (13–14), 3647–3679.

作者简介：谢晨阳，男，1999 年出生，硕士研究生。主要研究方向为复合材料制造及力学。
E-mail：XieCy@mail.nwpu.edu.cn
李玉军(通信作者)，男，1987 年出生，博士，助理教授，主要研究方向复合材料制造工艺力学、复合材料多尺度损伤与断裂。
E-mail：li.yujun@nwpu.edu.cn